

아세틸렌/공기 비에혼합 난류 제트화염의 Soot 생성에 대한 수치해석

Numerical Analysis for the Soot Formation Processes in Acetylene-Air Nonpremixed Turbulent Jet Flame

김 후 중*, 김 용 모**, 윤 명 원***
Hoojoong Kim, Yongmo Kim, Myongwon Yoon

ABSTRACT

The flame structure and soot formation in Acetylene-Air nonpremixed jet flame are numerically analyzed. We employed two variable approach to investigate the soot formation and oxidation processes. The present soot reaction mechanism involves nucleation, surface growth, particle coagulation, and oxidation steps. The gas phase chemistry and the soot nucleation, surface growth reactions are coupled by assuming that the nucleation and soot mass growth has the certain relationship with the concentration of pyrene and acetylene. We also employed laminar flamelet model to calculate the thermo-chemical properties and the proper soot source terms from the information of detailed chemical kinetic model. The numerical and physical model used in this study successfully predict the essential features of the combustion processes and soot formation characteristics in the reaction flow field.

주요기술용어 : Nonpremixed flame(비에혼합화염), Laminar flamelet(층류화염편), Soot(매연), PAH (다중 고리 방향족 탄화 수소)

Nomenclature

Y_s : mass fraction of soot
 N : soot number density, particles/m³
 M_{cs} : molar mass of soot, kg/kmol
 C_{min} : number of carbon atoms in the incipient soot
 N_A : Avogadors' number, particles/kmol

k : boltzmann constant, J/K
 ρ_s : density of the soot, kg/m³
 C_a : agglomeration rate constant
 P : probability density function
 T : temperature, K
 u, v : velocity components, m/s
 t : time, s
 Z : mixture fraction
 Γ : diffusion coefficient
 x : scalar dissipation rate, 1/s
 σ : Stefan-boltzmann constant

* 회원, 한양대학교 대학원
** 회원, 한양대학교 기계공학부
*** 회원, 국방과학연구소

1. 서론

공업용 버너, 가스 터빈 또는 내연기관과 같은 실제적인 연소기관들의 대부분은 탄화수소계 연료를 사용하며 이러한 연소기관들의 연소조건은 연료가 화학양론적인 양의 산화제와 만나 이산화탄소나 물을 생성하는 이상적인 조건과는 차이를 가지게 된다. 따라서 국부적으로 연료가 충분한 산화제와 반응하지 못하는 영역에서는 연소 부산물로 soot을 생성하게 된다. 이러한 soot의 발생은 심각한 환경오염이나 인체에 치명적인 문제를 일으키므로 soot의 생성 및 산화에 대한 충분한 이해를 전제조건으로 하여 배출량을 줄일 수 있는 방법을 필요로 하게 된다.

지난 수십년간 soot 생성에 대한 모델링 및 이러한 생성과정의 이해를 위하여 많은 연구가 진행되었으나 PAH의 화학반응모델 및 soot의 표면 반응 등의 복잡한 물리현상 때문에 서로 다른 여러 종류의 연료 및 작동조건에 적용할 수 있는 일반적인 이론이나 모델이 없는 실정이다. 따라서 본 연구에서는 축대칭 아세틸렌/공기 난류 제트 비 예혼합 화염에 대하여 중심축을 따르는 soot 체적분율을 측정 한 Angrill 등¹⁾의 실험결과와의 비교를 통해 soot 모델을 검증하고 특성을 살펴보고자 한다.

본 연구에서는 난류연소율을 모델링하기 위해 층류 화염편 모델을 적용하였다. 층류화염편 모델은 난류화염을 난류유동장에 의해 늘어나고 변형되는 층류 화염편들의 집합체로 가정한다. 이러한 접근방식은 중간생성화학종 및 라디칼의 상세정보를 포함하며 이를 soot 모델링에 직접적으로 이용할 수 있는 장점을 가지고 있다. 아세틸렌/공기 비예혼합 화염을 계산하기 위하여 Appel 등²⁾이 제안한 101개의 화학종과 544개의 반응단계를 가지는 상세화학 반응모델을 이용하여 온도, 밀도, 각 화학종의 농도를 미리 flamelet library에 혼합분율과 스칼라 소산율의 함수형태로 저장하였다. Soot의 수밀도와 질량분율에 대한 방정식을 이용하여 Soot의 화염장에서 분포하는 특

성을 살펴보았으며 각각의 방정식에 나타나는 생성항은 Lindstedt 등³⁾이 제안한 모델과 Frenklach 등⁴⁾이 제안한 모델을 이용하였다.

2. 물리모델 및 수치모델

2.1 지배방정식

축대칭 난류 연소유동장을 해석하기 위하여 질량가중 평균된 Navier-Stokes 방정식, k-ε 난류모델, 에너지 방정식, 그리고 평균 혼합분율의 분산(variance) 방정식을 이용하였으며 이 방정식들은 다음과 같이 대표되는 식으로 표현할 수 있다.

$$\frac{\partial}{\partial t}(\bar{\rho}\phi) + \frac{\partial}{\partial x_j}(\bar{\rho}\tilde{u}_j\phi) = \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\Gamma_\phi \frac{\partial \phi}{\partial x_j} \right) + S_\phi \quad (1)$$

여기서, ϕ 는 평균 축방향 속도, 평균 반경방향 속도, 평균 엔탈피, 난류 운동에너지와 그 소산율, 평균 혼합분율과 혼합분율의 분산을 포함하며 Γ_ϕ 와 S_ϕ 는 각 스칼라 양에 대응하는 난류 확산 계수 및 생성항을 나타낸다. 본 연구에서는 Kim 등⁵⁾에 의해 사용된 것과 동일한 확산계수 및 생성항을 사용하였다.

에너지 방정식은 평균 엔탈피 형태로 계산되며 이 방정식의 생성항은 복사열손실의 영향을 포함하게 된다. 본 연구에서는 화염장에서 광학두께가 얇다고 가정하여 복사열전달로 인한 생성항은 단지 방사(emission)에 의해서만 결정될 수 있다. 이러한 광학두께가 얇다는 가정 하에서 단위 체적당 복사 열손실률은 다음과 같이 표현될 수 있다.

$$Q_{rad} = 4\sigma \sum_k (P_k \cdot a_{p,k})(T^4 - T_b^4) \quad (2)$$

여기서, σ 는 stefan-boltzmann 상수, P_k 는 화학종 k의 분압을 나타내고 T는 온도, T_b 는 배경온도를 나타낸다. 복사 참여 화학종 k에 대한 Planck 평균 흡수계수, $a_{p,k}$ 는 참고문헌⁶⁾에서 제시한 값을 이용하였다.

지배방정식들은 유한체적법에 의해 계산되며

모든 스칼라 변수들이 격자점에 저장되는 비 엇갈린 격자계(non-staggered grid)를 이용하였다. 확산항은 2차의 정확도를 가지는 중앙차분법을 이용하여 차분화 하였고 대류항에 대해서는 수치적 확산을 줄이기 위하여 2차의 TVD 풍상차분법⁷⁾을 이용하였다. 속도장과 압력장의 결합은 개선된 PISO 알고리즘⁸⁾을 통해 다루어진다.

2.2 층류화염면(Laminar Flamelet) 모델

층류 화염면 모델은 난류화염을 난류유동장에 의해 늘어나고 변형되는 층류 화염면들의 집합체로 가정한다. 이러한 층류 화염면에서 모든 열역학적 상태량들은 혼합분율(mixture fraction)과 스칼라소산율(scalar dissipation rate)의 함수로 나타난다. 화염면에 수직인 방향을 혼합분율 좌표축으로 나타내면 화학종 방정식과 에너지 방정식은 혼합분율과 스칼라소산율 좌표계, 즉 flamelet 좌표계로 변환된다. 이렇게 변환된 방정식을 이용하여 flamelet library를 구성할 수 있으며 본 연구에서는 Pitsch등⁹⁾에 의해 변환된 방정식을 이용하였다.

아세틸렌/공기 화염을 해석하기 위하여 Appel 등²⁾이 제안한 101개의 화학종과 544개의 반응단계를 가지는 상세화학 반응모델을 이용하였다. 각각의 화학종에 대한 생성항은 화학반응식으로부터 계산되며 이 값은 변환된 방정식과 에너지 방정식의 생성항에 포함된다. 변환된 방정식으로부터 계산된 온도, 밀도, 모든 화학종의 농도 등은 혼합분율과 스칼라소산율의 함수 형태로 flamelet library에 저장된다.

유동장 각각의 위치에서 확률밀도 함수가 주어지면, 구해진 flamelet library를 가지고 다음과 같은 방법으로 평균 열역학적 및 화학적 상태량을 계산할 수 있다.

$$\bar{\phi} = \int_0^{\infty} \int_0^1 \phi(Z, \chi) P(Z, \chi) dZ dx \quad (3)$$

여기서, $P(Z, \chi)$ 는 혼합분율과 스칼라 소산율의

다중 확률밀도함수이다. 혼합분율과 스칼라 소산율이 통계적으로 독립적이라 가정하면 다중 확률밀도함수는 다음과 같이 간단히 표현할 수 있다.

$$P(z, x) = P(z) \cdot P(x) \quad (4)$$

복잡성을 피하기 위하여 본 연구에서는 각각의 확률밀도함수의 모양을 가정하였으며 혼합분율에 대한 확률밀도함수, $P(Z)$ 로는 Beta 함수, 그리고 스칼라 소산율에 대한 확률밀도함수, $P(\chi)$ 로는 log-normal 분포를 이용하였다.¹⁰⁾

혼합분율에 대한 확률밀도함수

$$P(z) = \frac{Z^{a-1}(1-z)^{b-1}}{\int_0^1 z^{a-1}(1-z)^{b-1} dz}$$

$$a = Z \left(\frac{Z(1-Z)}{Z'^2} \right) \quad (5)$$

$$b = (1-Z) \left(\frac{Z(1-Z)}{Z'^2} \right)$$

스칼라소산율에 대한 확률밀도함수

$$P(\chi) = \frac{1}{\chi \sigma \sqrt{2\pi}} \times \exp\left\{-\frac{1}{2\sigma^2}(\ln \chi - \mu)^2\right\} \quad (6)$$

식 (6)에서 나타나는 파라미터, μ, σ 는

$$\bar{\chi} = \exp(\mu + 0.5\sigma^2), \quad \sigma^2 = 2.0 \quad (7)$$

을 통해 결정하였다.

이때, 평균스칼라소산율은 다음과 같이 모델링하였다.

$$\bar{\chi} = C_{\bar{\chi}} \frac{k}{\epsilon} \bar{Z}'^2, \quad C_{\bar{\chi}} = 2.0 \quad (8)$$

2.3 Soot 모델링

본 연구에서는 난류연소 유동장에서의 soot 분포를 계산하기 위하여 soot의 수밀도에 대한 질량가중 평균($\bar{\phi}_n = \bar{n}/\bar{\rho}N_a$)과 soot의 질량분율($\bar{\phi}_v = \bar{\rho}_s \bar{f}_v / \bar{\rho}$)에 대한 방정식을 필요로 하게 되며 이는 다음과 같이 표현된다.

$$\frac{\partial \rho \tilde{\phi}_i}{\partial t} + \frac{\partial \rho \tilde{u}_j \tilde{\phi}_i}{\partial x_j} = \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\frac{\mu_e}{Pr_t} \frac{\partial \tilde{\phi}_i}{\partial x_j} \right) + \overline{S_{\phi_i}} \quad (9)$$

여기서, N_a 는 Avogadro 수이며 ρ 는 기체의 밀도, ρ_s 는 soot의 밀도이다. $\overline{S_{\phi_i}}$ 는 각 방정식의 생성항을 나타내며 본 연구에서는 다음과 같은 두 가지 방법을 통해 모델링된다.

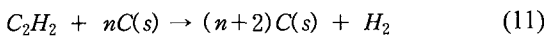
2.3.1 Lindstedt등의 soot 모델

Soot은 초기에 아세틸렌이나 PAH에 의해 발생한다. 초기에 생성된 Soot은 라디칼과 이온에 의한 반응에 의해 빠르게 질량이 성장하게 된다. 표면 질량 성장에 아세틸렌이 크게 영향을 끼친다는 것은 여러 연구를 통해서 제안되었으나 그 반응 과정에 관해서는 아직도 많은 연구가 진행되고 있다. Soot 질량분율의 생성항은 Soot의 초기 발생항, 표면 질량 성장항, 산화항의 세 개의 항으로 이루어진다. 먼저 Soot의 발생항은 아세틸렌에 의해 발생하는 것으로 본다. 표면 성장은 아세틸렌이 Soot 표면에 비해 한 영역과 반응하여 성장한다고 가정하였고 Soot 입자의 산화는 O_2 와 OH 에 의한 영향을 고려하였다. 수밀도식에 대한 생성항은 입자 생성항과 입자 감소항으로 나누어지는데 입자 생성항은 Soot 질량분율식의 발생항에서 얻어진다. 그리고 입자의 감소는 두 입자의 응집에 의해 감소하는 것만 생각한다. 응집에 관한 식은 Kent¹¹⁾등 여러 사람에 의해 제안된 모델을 사용하였다. 이것은 Soot 수밀도를 화염장 전체에 걸쳐 잘 나타낼 수는 없으나 비교적 근사한 값을 제공하기 때문에 이 식을 사용하였다. 이 가정은 다음과 같은 반응식으로 나타낼 수 있다.

Soot 생성



표면 질량 성장



산화



위의 반응식에 기초한 각각의 생성항들은 다음과 같이 나타낼 수 있다.

Soot의 질량분율에 대한 생성항

$$S_{\phi_s} = r_i M_{C(s)} + r_{ii} \rho M_{C(s)}^{1/3} Y_{C(s)}^{2/3} N^{1/3} - r_{iii} \rho M_{C(s)}^{1/3} Y_{C(s)}^{2/3} N^{1/3} \quad (13)$$

Soot의 수밀도에 대한 생성항

$$S_{\phi_n} = r_{iv} - r_v \rho^2 M_{C(s)}^{-1/6} Y_{C(s)}^{1/6} N^{11/6} \quad (14)$$

여기서, 각 항에 나타나는 반응물은 다음과 같은 Arrhenius 반응식의 형태를 갖는다.

$$r_i = 1.35 \times 10^6 \exp(-20634/T) [C_2H_2]$$

$$r_{ii} = 5.00 \times 10^2 \exp(-12079/T) f(\phi) [C_2H_2]$$

$$r_{iii} = 1.78 \times 10^4 T^{1/2} \exp(-19628/T) f'(\phi) [O_2]$$

$$r_{iv} = \frac{2}{C_{min}} N_A r_i$$

$$r_v = 2C_d \left(\frac{6M_{C(s)}}{\pi \rho_s} \right)^{1/6} \left(\frac{6kT}{\pi \rho_s} \right)^{1/2}$$

$$f(\phi) = \pi \left(\frac{6M_{C(s)}}{\pi \rho_s} \right)^{2/3}$$

$$f'(\phi) = \frac{f(\phi)}{M_{C(s)}}$$

위의 식에서 $M_{C(s)}$ 는 soot의 분자량(12.011 kg/kmol)이며 ρ_s 는 soot의 밀도(1800 kg/m³)이다. C_{min} 는 탄소원자가 탄소입자를 형성할 때 필요한 개수(9×10^4)이며 C_d 는 응집률의 모델 상수(3)이다. N_a 는 Avogadro 수(6.022×10^{26} particle/kmol)이며 k 는 Boltzmann 상수(1.381×10^{-23} J/K)이다.

본 연구에서는 또한 OH 에 의한 soot 입자의 산화를 고려하기 위하여 Bradley 등¹²⁾에 의해 제안된 다음과 같은 soot 산화율을 고려하며 이 반응물은 soot의 질량분율의 생성항에 포함된다.

$$r_{OH} = -0.36 T^{1/2} f'(\phi) [OH] \rho M_{C(s)}^{1/3} Y_{C(s)}^{2/3} N^{1/3} \quad (15)$$

2.3.2 Frenklach등의 soot 모델

이 모델은 soot precursor로써 아세틸렌을 사용

하지 않고 더 많은 탄소원자를 포함하는 PAH (Polycyclic Aromatic Hydrocarbon)를 soot precursor로 이용하며 본 연구에서는 PAH 화학종 중 pyrene(C₁₆H₁₀)을 soot precursor로 가정하였다. soot입자는 초기에 두 개의 PAH의 충돌과 결합에 의해 형성된다고 가정하였으며 그것의 생성률은 다음과 같은 형태로 주어지게 된다.

$$M_0^{Nucl} = 2.2 \sqrt{\frac{4\pi k_B T}{m_{PAH}}} d_{PAH}^2 N_{PAH}^2 \quad (16)$$

$$M_1^{Nucl} = 32M_0^{Nucl} \quad (17)$$

여기서, M₀는 직접적으로 soot의 수밀도를 나타내며 M₁은 전체 soot입자가 가지고 있는 탄소원자의 개수를 나타내며 간접적으로 soot의 질량분율과 관계 지을 수 있다. 위의 식에서 m_{PAH}는 PAH의 질량이며 d_{PAH}는 PAH의 충돌지름 (collision diameter)이다. N_{PAH}는 단위체적당 PAH의 갯수이며 k_B는 Boltzmann 상수(1.381 × 10⁻²³ J/K)이다.

soot입자의 충돌로 인한 soot의 수밀도의 감소율은 다음과 같이 표현된다.

$$M_0^{Coag} = -\frac{2.2}{2} \left(\frac{3}{4\pi}\right)^{\frac{1}{6}} \left(\frac{6k_B T}{\rho_s}\right)^{\frac{1}{2}} (4\sqrt{2})f_v^{\frac{1}{6}} M_0^{\frac{11}{6}} \quad (18)$$

표면반응에 의한 soot의 성장 및 산화는 Appel 등²⁾에 의해 제안된 HACA(Hydrogen Abstraction C₂H₂ Addition) 반응식을 이용하여 계산하였으며 이 반응식은 Table 1에 나타나 있다. soot의 성장은 soot 표면이 수소원자와 반응하여 radical 영역을 형성하게되며 이 영역에서 아세틸렌과 반응하여 이루어진다. 산소원자 또한 이러한 라디칼 영역과 반응하여 soot을 산화시키며 OH에 의한 산화는 soot 표면과의 반응을 통해 soot을 산화시킨다. 이러한 soot의 성장과 산화는 soot의 질량분율의 생성항에 포함되며 각각은 다음과 같은 반응률을 가지게 된다.

$$M_1^{C_2H_2} = k_4 [C_2H_2] \alpha \chi_{C_s} \cdot \pi C_s^2 M_{2/3} \quad (19)$$

Table 1 Surface growth and oxidation mechanism

No.	Reaction	k=AT ⁿ exp(-ERT)		
		A(cm ³ mol ⁻¹ s ⁻¹)	n	E (kcal/mol)
S1	C _{soot} -H+H↔ C _{soot} ·+H ₂	4.2 × 10 ¹³		13.0
S2	C _{soot} -H+OH↔ C _{soot} ·+H ₂ O	1.0 × 10 ¹⁰	0.734	1.43
S3	C _{soot} ·+H→ C _{soot} -H	2.0 × 10 ¹³		
S4	C _{soot} ·+C ₂ H ₂ → C _{soot} -H+H	8.0 × 10 ⁷	1.56	3.8
S5	C _{soot} ·+O ₂ → 2CO+products	2.2 × 10 ¹²		7.5
S6	C _{soot} -H+OH→ products	Reaction probability=0.13		

$$M_1^{O_2} = k_5 [O_2] \alpha \chi_{C_s} \cdot \pi C_s^2 M_{2/3} (-2) \quad (20)$$

$$M_1^{OH} = \gamma_{OH} [OH] \sqrt{\frac{\pi k_B T}{2m_{OH}}} \pi C_s^2 M_{2/3} (-1) \quad (21)$$

$$\text{여기서, } C_s = \left(\frac{6m_c}{\pi\rho_s}\right)^{1/3}$$

$$\chi_{C_s} = \frac{k_1 [H] + k_2 [OH]}{D} [C_{soot} - H]$$

$$D = k_{-1} [H_2] + k_{-2} [H_2O] + k_3 [H] + k_4 [C_2H_2] + k_5 [O_2]$$

$$[C_{soot} - H] = 2.3 \times 10^{19} \text{ sites/m}^2$$

최종적으로, soot의 질량분율과 수밀도에 대한 생성항은 다음과 같은 형태로 표현된다.

Soot의 질량분율에 대한 생성항

$$S_{\phi_s} = \frac{2m_{PAH}}{\rho N_a} [M_1^{Nucl} + M_1^{C_2H_2} + M_1^{O_2} + M_1^{OH}] \quad (22)$$

Soot의 수밀도에 대한 생성항

$$S_{\phi_n} = [M_0^{Nucl} - M_0^{Coag}] / N_a \quad (23)$$

3. 결과 및 고찰

Angrill 등¹⁾에 의한 아세틸렌/공기 비 예혼합 제트화염 실험에서 계측된 soot 체적분율을 예측하기 위하여 수치계산을 수행하였다. 질소로 희석

된 연료(50% C₂H₂ + 50% N₂)가 지름 2mm인 연료 노즐을 통해 3.2 l/min의 체적유량을 가지고 분출된다. 이 버너는 내부지름이 125mm인 원통형 굴뚝에 의해 둘러싸여져 있으며 산화제(80% N₂ + 20% O₂)는 연료노즐과 굴뚝사이에서 10 l/min의 체적유량을 가지고 분출된다.

Fig. 1은 본 연구에 적용된 수치모델을 이용하여 예측한 중심축을 따르는 평균 혼합분율의 분포를 나타낸 것이다. 노즐 출구에서 하류 방향으로 진행할수록 평균혼합분율이 점차 감소함을 알 수 있다. 본 연구에서는 질소로 50% 희석된 아세틸렌을 연료로 사용하였으며 이 경우 다음의 식 (24)와 같이 정의되는 화학양론적인 혼합분율은 0.13의 값을 갖는다.

$$Z_{st} = \frac{\frac{2Z_{O_2}}{\nu_O W_O}}{\frac{Z_{C_1}}{\nu_C W_C} + \frac{Z_{H_1}}{\nu_H W_H} + \frac{2Z_{O_2}}{\nu_O W_O}} \quad (24)$$

여기서, 1과 2는 각각 연료측과 공기측을 나타내며 ν 는 화학양론계수이다. 대략 $z=250$ mm인 지점이 화학양론적인 혼합분율을 가짐을 알 수 있다.

Fig. 2는 중심축을 따르는 평균온도 분포를 나타낸 것이다. 최대온도는 대략 $z=240$ mm인 지점에서 예측된다. 이 지점은 화학양론적인 혼합분율을 가지는 위치($z=250$ mm)보다 약간 상류에 위치하며, 따라서 최대온도는 연료과농영역에 약

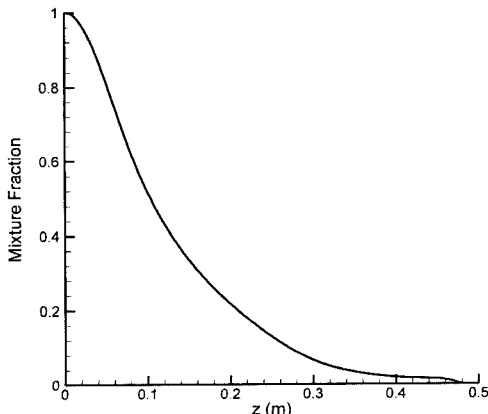


Fig. 1 Centerline profile of mean mixture fraction

간 치우쳐 위치함을 알 수 있다. 노즐 출구 근처 영역에서 상대적으로 낮은 온도와 복사 참여 매질의 농도가 낮아 복사에 의한 열손실은 매우 작은 값을 갖는 반면 flame tip 영역 이후에서 복사에 의한 열손실이 크게 나타남을 알 수 있다.

Fig. 3은 평균 온도와 아세틸렌의 농도, Lindstedt 모델에 의해 계산된 soot의 수밀도와 체적분율의 분포를 나타낸 것이다. 각 축방향 위치에서 최고온도는 약간 연료 과농영역으로 치우친 지점에서 발생함을 알 수 있다. 본 연구에서 연료와 soot precursor로써의 역할을 하는 아세틸렌은 연료노즐에서 최대값을 가지며 하류영역으로 갈수록 점점 감소된다. Soot의 수밀도는 연료과농영역에서 대부분 관측되며 각 축방향 위치에서 높은 온도를 가지는 지점보다 약간 더 연료 과농영역에서 최고값을 갖는다. 이는 본 연구에서 사용된 Lindstedt 모델에서 soot의 생성률은 온도와 soot precursor 농도에 영향을 받기 때문으로 사료된다.

상류영역에서 생성된 soot 입자는 하류영역으로 이동하면서 충돌에 의해 결합되므로 soot의 수밀도는 감소하며 flame tip 근처에서 대부분의 soot 입자는 soot의 산화과정에 의해 소모된다. 상류영역에서 생성된 soot 입자의 표면성장에 의하여 soot의 체적분율은 $z=165$ mm인 지점 근처에서 최대값을 가지며 이 지점 이후에서는 soot 표

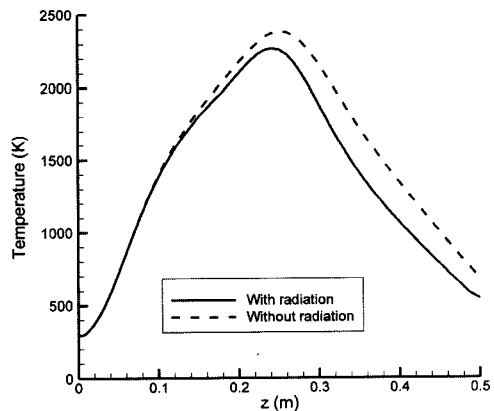


Fig. 2 Centerline profiles of mean temperature with and without radiative heat loss

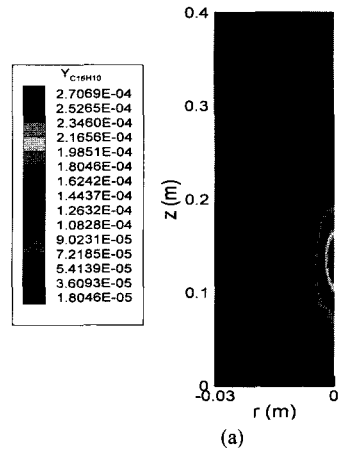
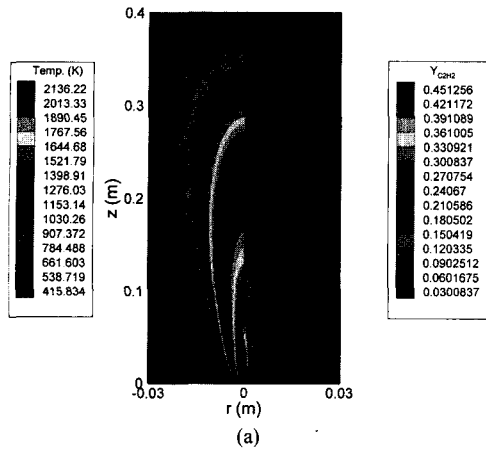


Fig. 3 Distribution of (a) mean temperature and acetylene mass fraction, and (b) soot number density and soot volume fraction with Lindstedt model. Dotted line represents stoichiometric mixture fraction

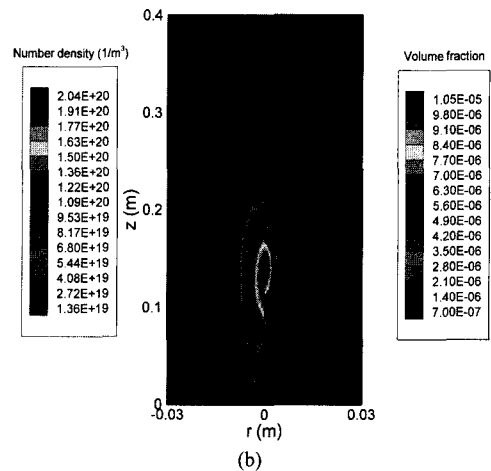


Fig. 4 Distribution of (a) pyrene mass fraction, and (b) soot number density and soot volume fraction with Frenklach model. Line represents stoichiometric mixture fraction

면에서의 산화 반응에 의해 체적분율이 감소할 수 있다.

Fig. 4는 본 연구에서 Frenklach 모델을 이용한 경우 soot precursor로 가정한 pyrene의 질량분율과 Frenklach 모델을 이용하여 예측된 soot의 수밀도와 체적분율의 분포를 나타낸 것이다. soot precursor로 사용되는 pyrene의 농도는 과농연료 영역에서 대부분 분포하며 아세틸렌 보다 온도가 높은 영역에 치우쳐 발생할 수 있다. Lindstedt 모델을 이용한 경우 대부분의 soot의 발생이 온도분포를 따라 분포하는 특성과 달리 Frenklach

모델을 이용한 경우에는 pyrene의 분포와 비슷한 형태를 가지고 있음을 알 수 있다. 이는 최고 pyrene 농도가 비교적 온도가 균일한 영역인 flame tip 근처에 분포함에 따라 soot의 발생률이 상대적으로 온도의 영향을 많이 받지 않아 나타난 결과로 사료된다. soot의 체적분율의 최대값은 대략 $z=140\text{mm}$ 인 지점에 위치하며 이는 Lindstedt 모델을 이용하여 예측된 최대 체적분율 위치보다 상류쪽이다. 체적분율이 최대인 지점을 지나면서 soot의 수밀도 보다 체적분율이 급격히 감소하며 이는 표면반응에 의한 soot의 산화량이 표면성장에 의해 발생된 soot의 양보다

큰 값을 가짐을 알 수 있다. Lindstedt 모델을 이용하여 예측한 결과와 마찬가지로 대부분의 soot은 연료과농영역에 분포하며 Frenklach 모델을 이용한 경우가 좀더 혼합분율(mixture fraction)이 높은 영역에서 분포함을 알 수 있다.

Frenklach 모델을 이용하여 soot의 농도를 예측한 결과가 좀더 상류쪽에 분포되는 특성을 자세히 살펴보기 위하여 두 모델을 이용하여 계산된 각각의 생성항을 Fig. 5에 나타내었다.

Soot의 결정화율(nucleation rate)은 Frenklach 모델을 이용한 결과가 하류 영역에 분포함을 알 수 있다. 이는 본 연구에서 사용된 연료가 아세틸렌이며 Lindstedt 모델에서 soot precursor 역할을 하는 화학종 역시 아세틸렌이어서 soot precursor

의 농도가 훨씬 더 연료과농영역에 분포하기 때문으로 사료된다. 또한 Frenklach 모델을 이용하여 계산된 결정화율은 soot precursor의 농도분포와 비슷하며 이는 앞서 밝힌바와 같이 soot precursor가 분포하는 영역에서 온도의 공간변화율이 크지 않기 때문이다. 이와는 달리 Lindstedt 모델을 이용한 결과는 온도의 의존성을 보여주고 있다. soot입자간의 충돌률은 결정화율과 비슷한 분포를 가지며 결정화율의 위치보다 약간 하류 영역에 분포한다. 이는 일단 생성된 soot입자가 유동에 의해 하류영역으로 이동하면서 입자 상호간의 충돌로 인해 soot입자수가 감소하기 때문이다. soot의 표면성장율은 두 경우 비슷한 형태를 가지나 Frenklach 모델을 이용한 결과가

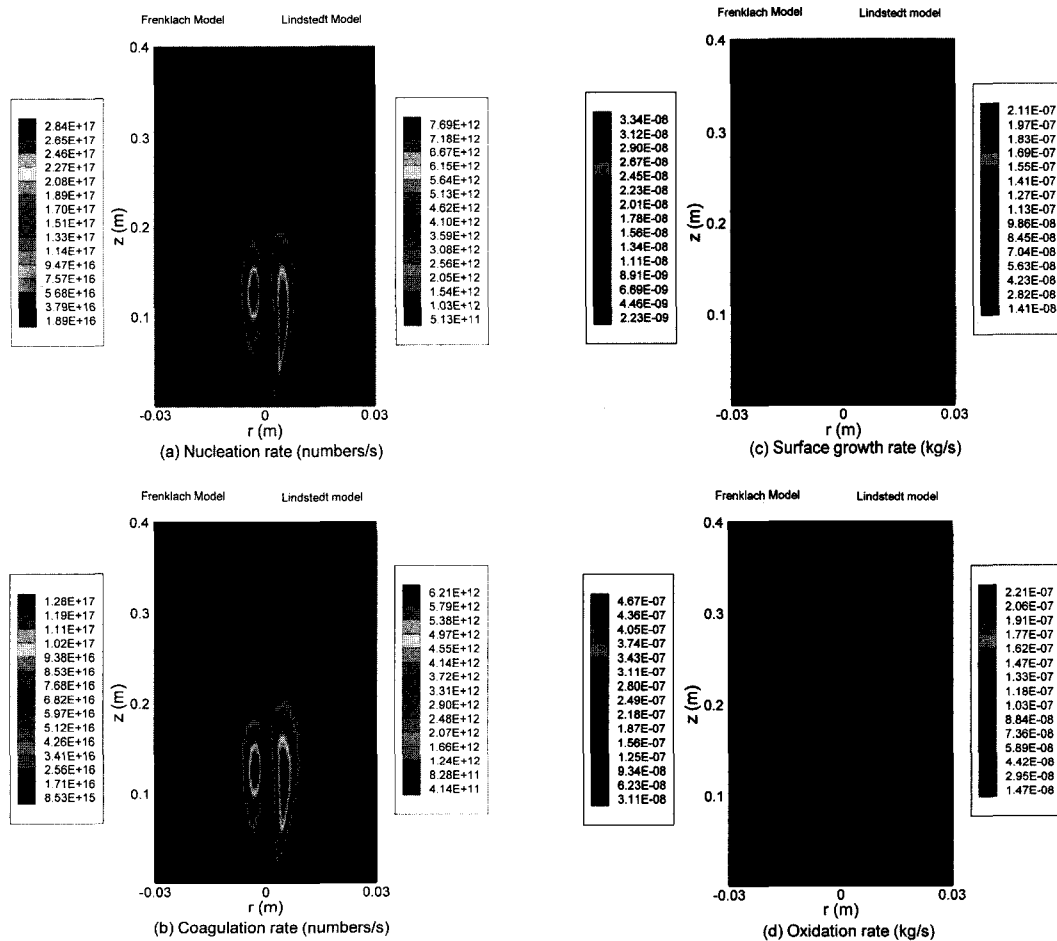


Fig. 5 Distributions of source terms of soot number density and mass fraction

약간 더 하류영역에 분포함을 알 수 있다. Fig. 5(d)에 나타난 soot 산화율은 산소와 OH 라디칼에 의한 soot 산화율의 합이다. soot 산화율은 결정화율과 표면성장률보다 중심축에서 반경방향으로 떨어진 위치와 축방향으로는 하류영역에 분포하며 이 영역을 지나면서 대부분의 soot 입자는 산화하게 된다. Lindstedt 모델을 이용하여 계산된 soot 산화율이 Frenklach 모델에 의해 계산된 soot 산화율보다 훨씬 더 하류 영역에 분포함을 알 수 있다. 따라서 상류영역에서 생성되고 표면 성장된 soot 입자가 훨씬 더 하류영역에서 산화되기 때문에 soot의 최고 체적분율이 하류영역에서 분포하게 된다.

Fig. 6은 Angrill 등¹⁾에 의해 측정된 실험치와 수치계산을 통한 예측값을 비교한 것이다. Lindstedt 모델을 이용하여 예측값을 비교한 것이다. Lindstedt 모델을 이용하여 예측된 결과는 실험치보다 대략 63mm 정도 하류 영역에서 최대값을 가지며 최대 soot 체적분율 또한 약간 높은 값을 가짐을 알 수 있다. 그러나 전체적인 soot의 분포 영역의 길이는 비슷한 값을 가짐을 알 수 있다. 좀 더 실험치와 근접된 결과를 예측하기 위하여 soot precursor로써 pyrene을 사용한 경우 최대 체적분율의 위치가 약간 실험치 쪽으로 이동하였으나 여전히 40mm 정도 하류 영역에 위치하

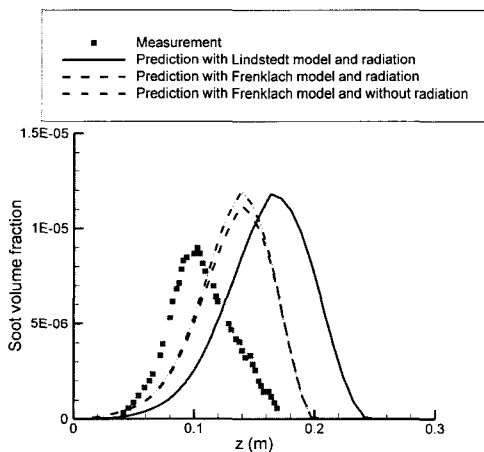


Fig. 6 Comparison of soot volume fraction along the centerline(R=0mm)

였으며 최대값의 크기도 약간 높은 값을 가지고 있음을 알 수 있다. 앞에서 이야기 한바와 같이 Frenklach 모델을 이용한 경우 soot precursor의 분포와 체적분율의 분포가 매우 흡사하기 때문에 pyrene의 분포특성이 좀 더 상류쪽으로 분포함으로써 좀 더 개선된 soot 예측능력을 가질 것으로 사료된다. 이를 위해서는 난류의 시간척도와 길이 척도를 정확히 예측이 필요할 것으로 사료된다. 복사열손실의 영향을 고려하지 않은 경우, 기체장의 높은 온도의 예측으로 인해 soot의 발생률을 상대적으로 크게 예측하게 되며 이로 인해 복사 열손실의 영향을 고려한 결과보다 약간 더 높은 soot 체적분포를 가지게 된다.

4. 결론

아세틸렌/공기 비예혼합 난류 제트화염의 구조와 soot 생성에 대한 수치 해석결과로부터 다음과 같은 결론을 도출할 수 있었다.

- 1) 중심축을 따르는 온도분포를 살펴본 결과 최고온도는 연료과농 영역으로 약간 치우쳐 분포하였다.
- 2) 두 모델 모두 soot의 연료과농 영역에서 분포하며 하류 영역으로 갈수록 soot의 수밀도는 입자간의 충돌로 인한 결합으로 감소하며 soot의 체적분율은 표면에서 산화반응을 통해 급격히 감소하였다.

3) Lindstedt 모델을 이용한 경우 Frenklach 모델보다 표면 산화율이 훨씬 더 하류영역에 분포하였으며 이로 인해 최고 체적분율의 위치 또한 하류영역에 분포하였다.

4) 중심축을 따르는 soot의 체적분율을 실험치와 비교한 결과 두 경우 모두 실험치보다 하류영역에 분포하였으나 최고 soot 체적분율과 분포경향은 비슷하게 예측하였다. Frenklach 모델을 이용한 경우 soot precursor의 분포와 체적분율의 분포가 좀 더 상류쪽으로 분포함으로써 좀 더 개선된 soot 예측능력을 가질 것으로 보이며 이를 위해서는 난류의 시간척도와 길이척도의 정확한

예측이 필요할 것으로 사료된다.

5) 복사열손실을 고려하지 않은 결과는 높은 평균온도의 예측을 가져왔으며 이로 인해 soot의 체적분을 또한 높게 예측하였다.

참 고 문 헌

- 1) O. Angrill, H. Geitlinger, T. Streibel, R. Suntz, H. Bockhorn, "Influence of Exhaust Gas Recirculation on Soot Formation in Diffusion Flames," 28th Symposium (International) on Combustion, The Combustion Institute, pp. 2643-2649, 2000.
- 2) J. Appel, H. Bockhorn, M. Frenkach, "Kinetic Modelling of Soot Formation with Detailed Chemistry and Physics: Laminar Premixed Flame of C2 Hydrocarbons," Combust. and Flame, Vol.121, pp.122-136, 2000.
- 3) M. Fairweather, W. P. Jones, R. P. Lindstedt, "Predictions of Radiative Transfer from a Turbulent Reacting Jet in a Cross-Wind," Combust. and Flame, Vol.89, pp.45-63, 1992.
- 4) M. Frenklach, H. Wang, In Soot Formation Combustion, Mechanism and Models, Bockhorn, H., Ed., Springer Series in Chemical Physics 59, Springer-Verlag, pp.165-192, 1994.
- 5) S. K. Kim, Y. M. Kim, "Prediction of Detailed Structure and NOx Formation Characteristics in Turbulent Nonpremixed Hydrogen Jet," Combust. Sci. and Tech., Vol.156, pp.107-137, 2000.
- 6) <http://www.ca.sandia.gov/tdf/Workshop/Submdels.html>.
- 7) S. R. Chakravarthy, S. Osher, AIAA-85-0363, 23rd Aerospace Sciences Meeting, Reno, NV, 1985.
- 8) Y. M. Kim, C. P. Chen, J. P. Ziebarth, Y. S. Chen, Numerical Heat Transfer, Vol.25, pp. 21-42, 1994.
- 9) H. Pitsch, N. Peters, "A Consistent Flamelet Formulation for Non-Premixed Combustion Considering Differential Diffusion Effects," Combust. and Flame, Vol.114, pp.26-40, 1998.
- 10) D. Lentini, "Assessment of the Stretched Laminar Flamelet Approach for Non premixed Turbulent Combustion," Combust. Sci. and Tech., Vol.100, pp.95-122, 1994.
- 11) J. H. Kent, H. G. Wagner, Combust. and Flame, Vol.47, p.53, 1982.
- 12) D. Bradley, G. Dixon-Lewis, S. El-Din Habik, E. M. J. Mushi, 20th Symposium (International) on Combustion, The Combustion Institute, Pittsburgh, p.931, 1984.